



Universidad
Zaragoza

Cadenas fermiónicas compuestas y aislantes topológicos

Trabajo de Fin de Grado

Autor:

Francisco López Gómez

Director:

Fernando Falceto Blecua

Facultad de Ciencias

2020

Índice

1. Introducción	1
2. El modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH)	2
2.1. Hamiltoniano del bulk	2
2.2. Espacio de momentos	3
3. Modelo ideal	3
4. Introducción de defectos	6
4.1. Cambio en el signo de los acoplos	7
4.2. Cambio en el número de fermiones	10
5. Cadena con desorden aleatorio	12
5.1. Simetría quirál	12
5.2. Desorden quench	13
5.3. Desorden annealed	17
6. Aislantes topológicos	19
7. Conclusiones	20
Bibliografía	22

1. Introducción

El éxito de la teoría cuántica en todos los ámbitos de la física es innegable. Antes de su formulación uno de los principales métodos para clasificar distintos materiales era en función de su conductividad, pudiendo describir un comportamiento aislante o conductor.

Gracias a la teoría cuántica se pudo formular la teoría de bandas, la cual nos explica que la conductividad es debida al rango de niveles de energía disponibles en el material, que en algunos casos presenta zonas prohibidas o gaps de energía que no pueden ser ocupados por los electrones. Mientras los metales no presentan este gap, los aislantes si que lo tienen, originando distintos niveles o bandas de energía. Una de las propiedades de la teoría de bandas nos muestra que en la conductividad solo contribuyen las bandas parcialmente ocupadas, luego solo nos interesarán la banda de mayor energía o banda de conducción y la última banda llena o banda de valencia. La aparición de un gap impedirá que los electrones accedan a la banda de conducción, permaneciendo en la banda de valencia sin contribuir a la conductividad, lo que será un material aislante.

En este trabajo estudiaremos sistemas de fermiones acoplados entre sí, que formularemos mediante el modelo de Su-Schrieffer-Heeger. Aquí el gap de energías se verá modificado por la relación de acoplo entre los fermiones, pudiendo obtener espectros como metales o aislantes. También estudiaremos las consecuencias que tienen ciertas modificaciones sobre los acoplos y sus efectos al carácter conductivo del material, así como la aparición de forma natural de estados localizados en sus fronteras. Recientemente se han descubierto unos materiales conocidos como aislantes topológicos. Estos son aislantes en su interior mientras que en los bordes presentan un carácter conductivo. Al final del trabajo veremos la relación que tienen con nuestro caso.

2. El modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH)

El modelo más sencillo del que partiremos consiste en una cadena unidimensional de fermiones sin espín conectados a sus primeros vecinos mediante diferentes acoplos, $t_- = t - d$ y $t_+ = t + d$, que irán alternándose. Consideraremos que la cadena está compuesta por N celdas unitarias, en la que cada una se corresponderá con una pareja de fermiones acoplados. Dentro de la propia cadena distinguiremos dos subcadenas en la que los fermiones pueden encontrarse, A o B.



Figura 1: Representación del modelo SSH. Los enlaces simples se corresponden al acoplo $t - d$, mientras los enlaces dobles serán $t + d$. Las subcadenas A y B se identifican mediante el color en la imagen de los fermiones, rojo y azul respectivamente.

Este sistema se describe mediante el hamiltoniano de Su-Schrieffer-Heeger basado en el modelo de *tight-binding*:

$$H = t_- \sum_{i=1}^N (|i, B\rangle \langle i, A| + h.c.) + t_+ \sum_{i=1}^{N-1} (|i+1, A\rangle \langle i, B| + h.c.) \quad (2.1)$$

Donde $|i, J\rangle$ con $J = \{A, B\}$ representan el estado del electrón i -ésimo ocupado en la cadena J , y $h.c.$ el hermítico conjugado. Escogeremos ambos acoplos reales y positivos, $t_-, t_+ \geq 0$. Las propiedades más importantes de este sistema aparecerán en el límite termodinámico, es decir, cuando $N \rightarrow \infty$. Para simplificar el hamiltoniano, lo podemos reescribir también mediante los operadores de creación (a_i^\dagger y b_i^\dagger) y destrucción (a_i y b_i):

$$H = t_- \sum_{i=1}^N (a_i^\dagger b_i + b_i^\dagger a_i) + t_+ \sum_{i=1}^{N-1} (b_i^\dagger a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger b_i) \quad (2.2)$$

Que cumplen las siguientes relaciones de anticonmutación:

$$\begin{aligned} \{a_l^\dagger, a_m^\dagger\} = \{a_l, a_m\} = 0 & \quad \{a_l^\dagger, a_m\} = \delta_{lm} \\ \{b_l^\dagger, b_m^\dagger\} = \{b_l, b_m\} = 0 & \quad \{b_l^\dagger, b_m\} = \delta_{lm} \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.1. Hamiltoniano del bulk

Nuestra cadena al igual que la mayoría de sólidos se puede separar en dos partes, los bordes (*edges*) y el volumen central (*bulk*). Como hemos dicho, la mayoría de las propiedades de nuestra cadena serán más visibles en el límite termodinámico, para lo cuál utilizaremos condiciones periódicas de Bon-von Karman, cerrando nuestra cadena en forma de anillo. Ahora el bulk será la parte principal del sistema, además de poseer invariancia traslacional que nos será de gran

utilidad. Para ello asignamos $a_{N+1}^\dagger = a_1^\dagger$ y $b_{N+1}^\dagger = b_1^\dagger$. De esta manera el hamiltoniano del bulk queda:

$$H_{bulk} = \sum_{i=1}^N (t_- |i, B\rangle \langle i, A| + t_+ |i+1, A\rangle \langle i, B|) + h.c. \quad (2.4)$$

Este hamiltoniano es el que deberemos de resolver. Ahora solo tenemos que encontrar las energías del sistema resolviendo la ecuación de Schrödinger [1]:

$$H_{bulk} |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \quad \text{con } i=\{1, \dots, 2N\} \quad (2.5)$$

2.2. Espacio de momentos

En los sólidos cristalinos la ubicación de los átomos es de forma periódica, por lo que toda la estructura del sólido se puede generar mediante la repetición de una celda unidad. Esta repetición origina un potencial cristalino periódico, de forma que los autoestados del hamiltoniano cumplen el teorema de Bloch:

$$\psi(r) = e^{ik \cdot r} u(r) \quad (2.6)$$

Donde k es el momento y $u(r)$ son funciones con la misma periodicidad que la red. Como vemos nuestro sistema presenta una periodicidad a partir de las celdas unitarias ya definidas. Gracias a esto y a la invariancia traslacional podemos definir el hamiltoniano del bulk en el espacio de momento sobre la primera zona de Brillouin. Para ello solo tendremos que realizar un cambio de base con los estados de ondas planas para cada una de las dos subredes:

$$\zeta_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{in\phi_k} a_n \quad \mu_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{in\phi_k} b_n \quad (2.7)$$

De esta forma podemos escribir el hamiltoniano de forma matricial quedando:

$$H_{bulk} = \sum_k H(k) = \sum_k \begin{pmatrix} \zeta_k^\dagger & \mu_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_- + t_+ e^{-ik} \\ t_- + t_+ e^{ik} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_k \\ \mu_k \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

3. Modelo ideal

Ahora ya podemos obtener la relación de dispersión $E(k)$ a partir del hamiltoniano construido. Como la función de ondas es de cuadrado integrable, a partir de la ecuación de Schrödinger en notación bra-ket y utilizando el formalismo matricial podemos deducir que $H(k)^2 = E(k)^2 \cdot \mathbb{1}$ donde $\mathbb{1}$ se corresponde con la matriz identidad de orden $2N$. De la relación anterior deducimos:

$$E(k) = \pm |t_- + t_+ e^{-ik}| = \pm \sqrt{t_-^2 + t_+^2 + 2t_- t_+ \cos(k)} \quad (3.1)$$

Y podemos obtener el espectro de energías para distintos valores de t_- y t_+ .

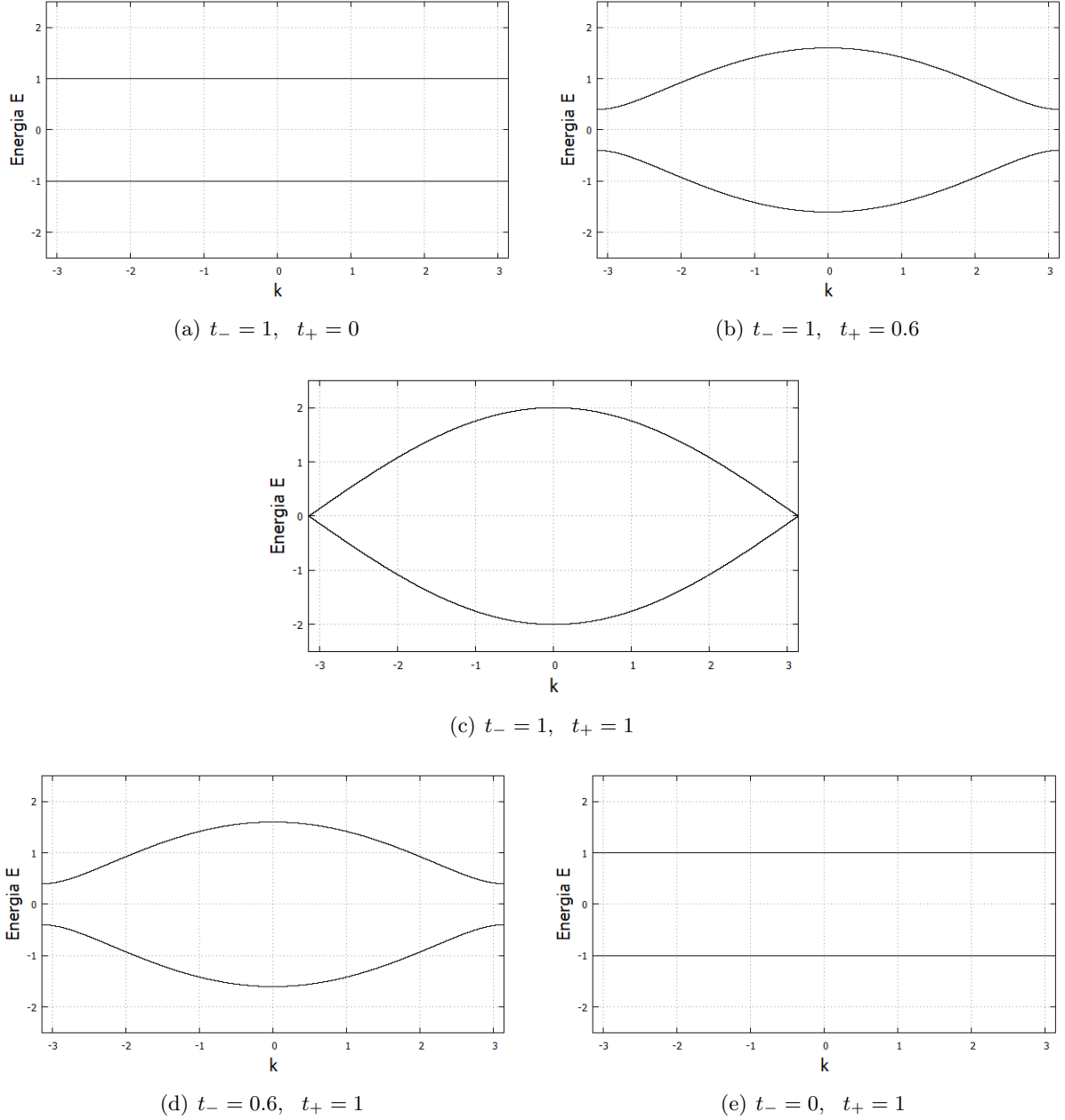


Figura 2: Espectros de energía para diferentes acoplos t_- y t_+ . Solamente cuando los acoplos t_+ y t_- son iguales el sistema presenta un carácter conductor.

Como vemos, en los casos que $t_- \neq t_+$ existe un gap de energías en los bordes de la primera zona de Brillouin entre la banda de valencia y la banda de conducción de anchura $2d$ con $d = |t_- - t_+|$, representando un aislante. Por lo tanto el modelo describe un comportamiento conductor cuando el gap de energías se cierra, es decir, si $t_+ = t_-$.

La diferencia entre acoplos es algo que ocurre en la naturaleza normalmente, en forma de una distorsión de Peierls[4] en la que el material reordena el espacio interatómico. Aunque esta transición cuesta energía al sistema el gap de energías se va abriendo, de forma que la banda de valencia disminuye su energía y la banda de conducción aumenta, pero esta por definición nunca se encuentra llena, y en conjunto la energía neta de los electrones del sistema disminuye.

Para obtener más información sobre el sistema definimos una nueva representación del hamiltoniano en el espacio de momentos:

$$H(k) = d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y + d_z(k)\sigma_z = \mathbf{d}(\mathbf{k})\sigma \quad (3.2)$$

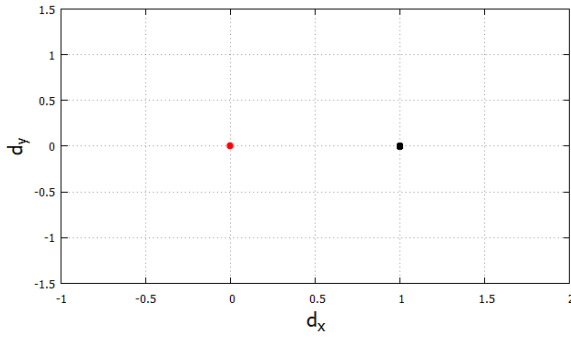
Donde σ_i con $i = \{x, y, z\}$ corresponden a las matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

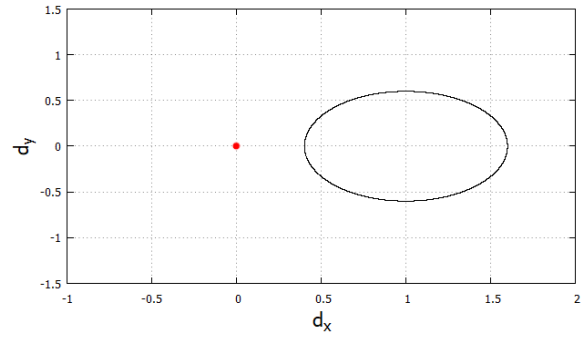
Y d_i son los coeficientes, dependientes del momento k , de la forma:

$$d_x(k) = t_- + t_+ \cos k \quad d_y(k) = t_+ \sin k \quad d_z(k) = 0 \quad (3.4)$$

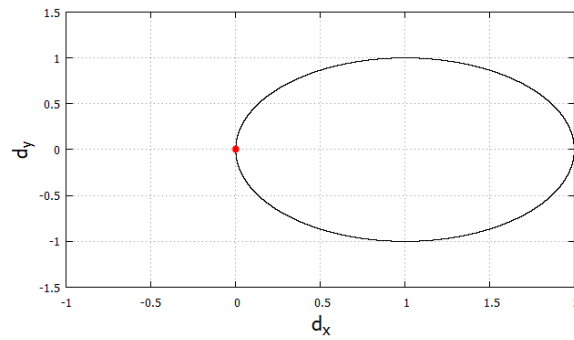
Según el momento k vaya recorriendo una trayectoria desde 0 a 2π , iremos obteniendo una circunferencia en el plano formado por d_x y d_y . En otros casos de mayor dimensión este recorrido no tiene porque ser así, pero siempre deberá ser cerrado ya que el hamiltoniano en el espacio de momentos es periódico.



(a) $t_- = 1$, $t_+ = 0$



(b) $t_- = 1$, $t_+ = 0.6$



(c) $t_- = 1$, $t_+ = 1$

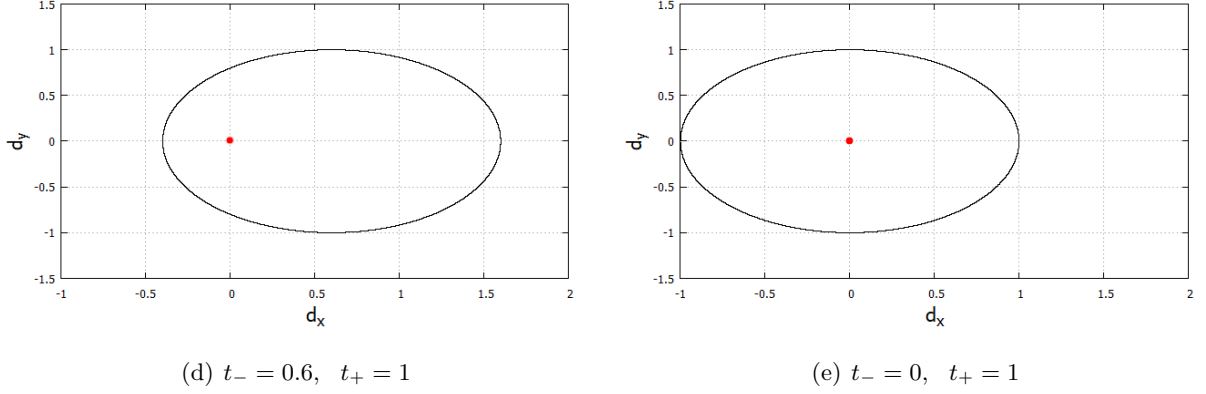


Figura 3: Representación en el plano d_x, d_y para los casos de la figura 2. El sistema será conductor cuando $t_- = t_+$ y por tanto el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ atraviesa el origen de coordenadas marcado en rojo.

De esta forma el material será aislante si el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ no atraviesa el origen de coordenadas. La cantidad de vueltas alrededor del origen es conocido como el *bulk winding number* ν . Cuando $t_+ < t_-$, $\nu = 0$ nos encontraremos en la fase trivial, pero si $t_+ > t_-$, $\nu = 1$ nos encontramos en la fase topológica. Esta cantidad es un invariante topológico del sistema y como veremos se corresponde al número de estados presentes en el borde de la cadena abierta, lo que se conoce como la relación *bulk-edge*.

4. Introducción de defectos

Tras estudiar el modelo más sencillo, vamos a ir añadiendo diferentes imperfecciones sobre la cadena definida en el modelo SSH y ver sus consecuencias. Empezaremos modificando uno de los acoplos al que llamaremos t_0 , de manera que si $t_0 = t_+$ tendremos el modelo con condiciones de contorno periódicas descrito por el hamiltoniano (2.4); y si $t_0 = 0$ nuestra cadena estará abierta y aparecerán estados de borde en la fase topológica. De este modo podremos estudiar la correspondencia *bulk-edge*.

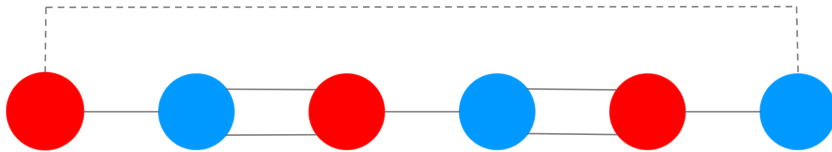


Figura 4: Variación sobre la cadena definida por el modelo SSH. La línea punteada representa el acoplo variable t_0 , además de proporcionar las condiciones periódicas de contorno.

Si escribimos el hamiltoniano del sistema con el nuevo acoplo t_0 tenemos:

$$H = t_- \sum_{i=1}^N (a_i^\dagger b_i + h.c.) + t_+ \sum_{i=1}^{N-1} (b_i^\dagger a_{i+1} + h.c.) + t_0 (b_N^\dagger a_1 + a_1^\dagger b_N) \quad (4.1)$$

Para obtener las energías del sistema no es útil cambiar a la base de los modos de Fourier. En este caso escribiremos el hamiltoniano en notación matricial en la base del espacio real, resultando una matriz de orden $2N$:

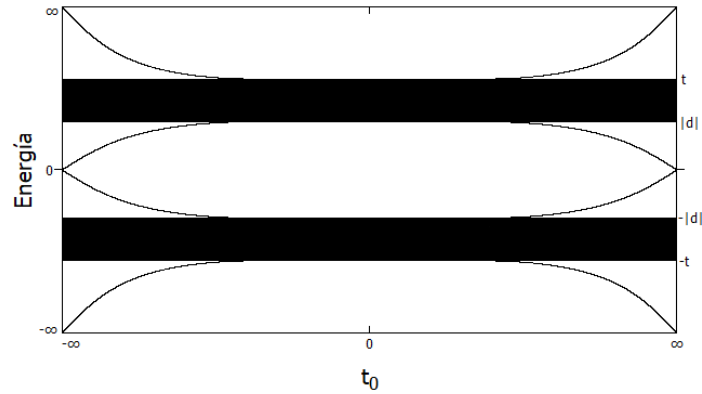
$$H = \begin{pmatrix} 0 & t_- & 0 & 0 & \dots & t_0 \\ t_- & 0 & t_+ & 0 & \dots & 0 \\ 0 & t_+ & 0 & t_- & \dots & 0 \\ 0 & 0 & t_- & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & t_+ \\ t_0 & 0 & 0 & 0 & t_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

El código empleado para obtener las energías y autoestados del sistema se puede visualizar en el Anexo I.

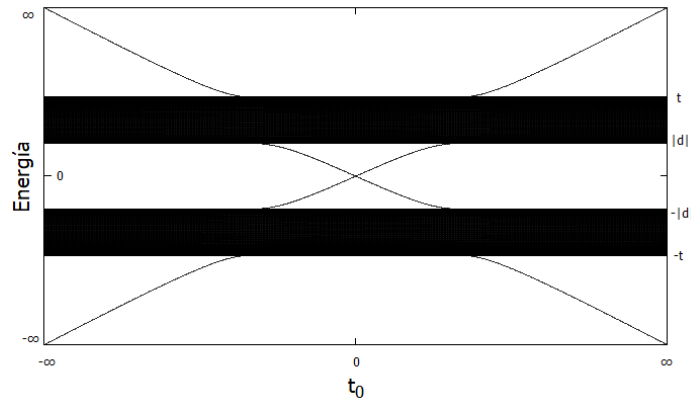
En el caso de la figura 2 vimos como el signo del parámetro d no era relevante en la forma del espectro de energías, sin embargo, ahora al tener un acoplo independiente del resto no será equivalente el sistema con un valor positivo o negativo para d . También será relevante el caso en que el número de celdas unitarias sea par o impar, ya que los acoplos laterales a t_0 serán iguales o alternados.

4.1. Cambio en el signo de los acoplos

Empezaremos estudiando el caso en que el parámetro d cambia de signo, de manera que pasamos de la fase trivial ($d < 0$) a la fase topológica ($d > 0$).



(a) $t = 1.2$, $d = -0.5$



(b) $t = 1.2$, $d = 0.5$

Figura 5: Espectros de energías para fase trivial (a) y la fase no trivial o topológica (b).

En las figuras 5a y 5b podemos reconocer varias similitudes. Estas, al igual que todos los espectros que veremos en el trabajo, presentan las bandas de valencia y conducción. Los fermiones que se encuentran aquí presentan energías determinadas por los valores de los acoplos en el bulk y sus funciones de onda se encuentran extendidas a lo largo de toda la cadena.

En este trabajo estamos interesados en los estados que aparecen fuera de las bandas. En primer lugar estudiamos los estados de energía $|E| \gg 1$ para $|t_0| \gg t_{\pm}$, los cuáles surgen tanto en la fase topológica como trivial. Los estados aquí presentes son muy robustos respecto a perturbaciones de orden menor que t_0 . Además permanecen confinadas en un único fermión incluso para valores de energía próximos a las bandas, donde se extienden mínimamente.

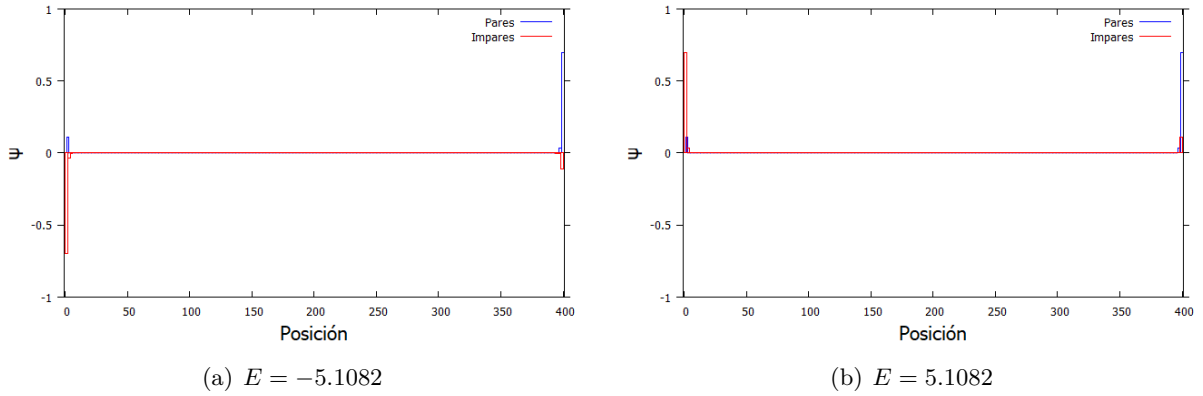


Figura 6: Estados de máxima energía $|E|$ en la fase trivial para $t_0 = 5$. Estas funciones de onda se van localizando más sobre los extremos del defecto t_0 a medida que el valor de este aumenta.

Comenzamos el estudio de los estados entre bandas por los de energía nula para $t_0 = 0$ en la fase topológica. Aunque la invariancia traslacional se ha perdido, en este caso podremos calcular como son los autoestados. Para ello partimos de la ecuación de Schrödinger con una función de ondas genérica de energía cero y coeficientes t_+, t_- dependientes de la posición en la cadena.

$$H \sum_{m=1}^N (\alpha_m |m, A\rangle + \beta_m |m, B\rangle) = 0 \quad (4.3)$$

Donde H es (4.2) para $t_0 = 0$. Desarrollando obtenemos las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} t_{-n}\alpha_n + t_{+n}\alpha_{n+1} &= 0; & t_{+n}\beta_n + t_{-n+1}\beta_{n+1} &= 0 & \text{si } n = 1, \dots, N-1 \\ t_{-N}\alpha_N &= 0; & t_{-1}\beta_1 &= 0 & \text{en los extremos} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Cuya solución es:

$$\begin{aligned} \alpha_m &= \prod_{j=1}^{m-1} \frac{-t_{-j}}{t_{+j}} \alpha_1 & \text{cuando } m = 2, \dots, N \\ \beta_m &= \frac{-t_{-N}}{t_{+m}} \prod_{j=m+1}^{N-1} \frac{-t_{-j}}{t_{+j}} \beta_N & \text{cuando } m = 1, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Según las condiciones de contorno de (4.4) todos los términos serían nulos y no existiría dicho estado; sin embargo (4.5) admite una solución aproximada. Para ello definimos los valores medios

de los acoplos a lo largo del bulk.

$$\overline{\log |t_-|} = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \log |t_{-n}|; \quad \overline{\log |t_+|} = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \log |t_{+n}| \quad (4.6)$$

De esta manera las soluciones obtenidas pasan a ser:

$$|\alpha_N| = |\alpha_1| e^{\frac{-(N-1)}{\xi}}; \quad |\beta_1| = |\beta_N| e^{\frac{-(N-1)}{\xi}} \frac{|t_{-N}|}{|t_{-1}|} \quad (4.7)$$

donde $\xi^{-1} = \overline{\log |t_+|} - \overline{\log |t_-|}$ es la longitud característica. Así en el límite termodinámico aparecerán dos estados:

$$|L\rangle = \sum_{m=1}^N \alpha_m |m, A\rangle; \quad |R\rangle = \sum_{m=1}^N \beta_m |m, B\rangle \quad (4.8)$$

Estas funciones de onda solamente se localizan en uno de los dos extremos y decaen de manera exponencial a lo largo de la cadena. Además ahora los coeficientes no nulos en el extremo izquierdo(derecho) se encuentran en la subred A(B), es decir, son impares(pares). Sin embargo, dado que hay degeneración de energía, la forma de los estados depende de nuestra elección.

Por ello, para comprender mejor las simetrías del sistema es preferible tomar un valor de $t_0 \neq 0$, de manera que podemos eliminar la degeneración y representar los estados de $E > 0$ y $E < 0$ a la vez que estudiamos los estados de energía nula si $t_0 \ll 1$.

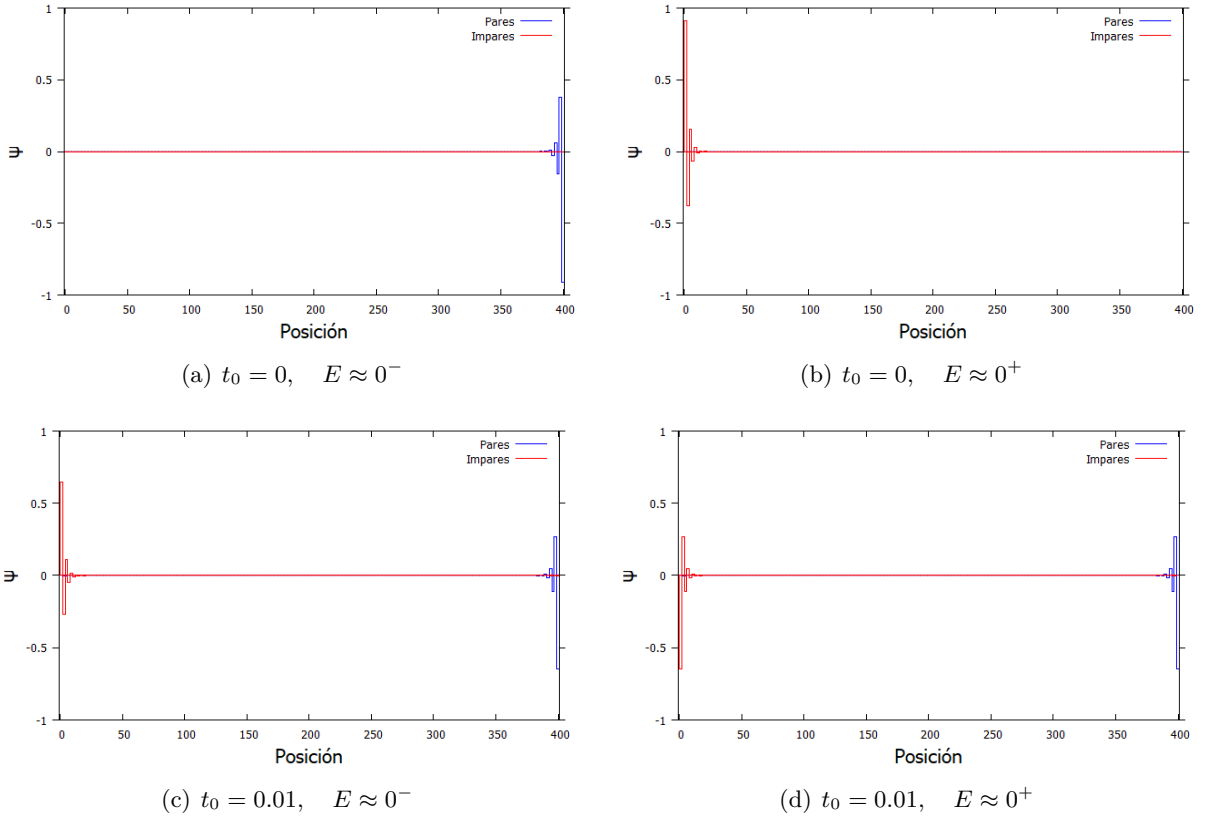


Figura 7: Estados de energía nula en la fase topológica. En el caso $t_0 \neq 0$ las funciones de onda confinadas en cada extremo desaparecen y surge un estado conductor sobre el defecto.

Para valores no nulos del acoplo, estos estados pasan a localizarse a ambos lados del defecto. Este comportamiento es similar a los aislantes topológicos en dos dimensiones de los cuáles hablaremos. Vale la pena mencionar que esta situación aparece incluso para valores de N muy bajos, ya que la mayoría de los fermiones se encuentran en las bandas, mientras solo dos son los que tienen la posibilidad de promocionar de la banda de valencia a la de conducción.

En la fase trivial los estados de energía nula surgen cuando t_0 predomina sobre toda la cadena, localizándose en sólo uno de los fermiones de posición par(impar) en el extremo izquierdo(derecho) y extendiéndose según t_0 disminuye. Al contrario que en la fase topológica donde aplicamos un valor de $t_0 \neq 0$ para romper la degeneración, pero ya existían los estados conductores entre las bandas, ahora aplicar un valor no nulo de t_0 es una condición necesaria para obtener los estados de borde y así un carácter conductor.

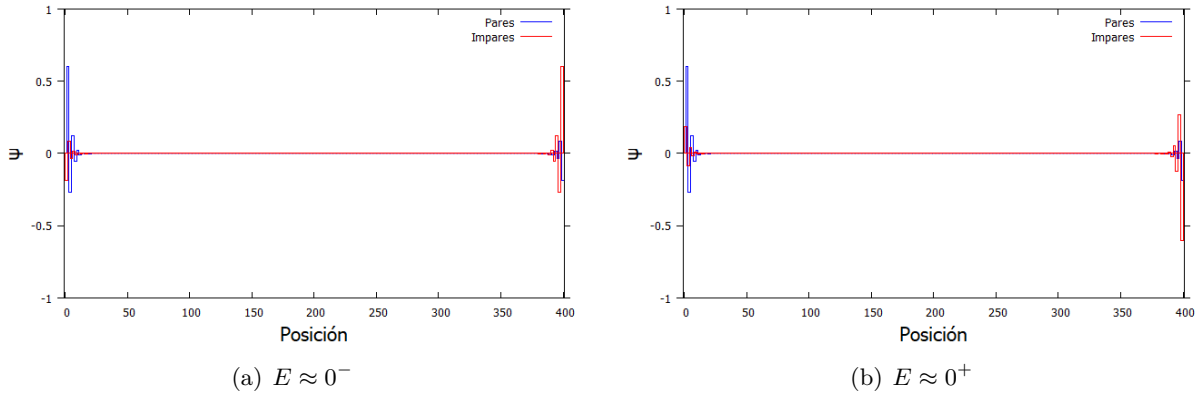
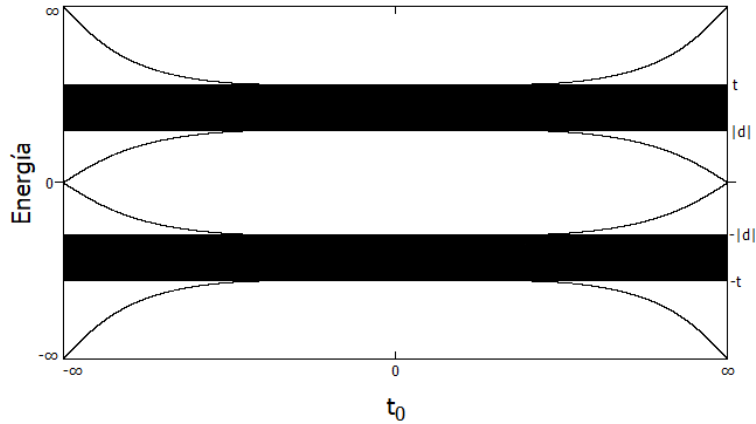


Figura 8: Estados entre bandas en la fase trivial para $t_0 = 5$. Según t_0 aumenta, las funciones de onda extendidas que se encontraban en las bandas van localizándose sobre los extremos del defecto, lo que permitirá conectar ambas bandas.

4.2. Cambio en el número de fermiones

Otra de las posibles modificaciones sobre el modelo SSH es retirar un fermión de manera que la última celda unidad de la cadena esté incompleta.



(a) $t = 1.2$, $d = 0.5$

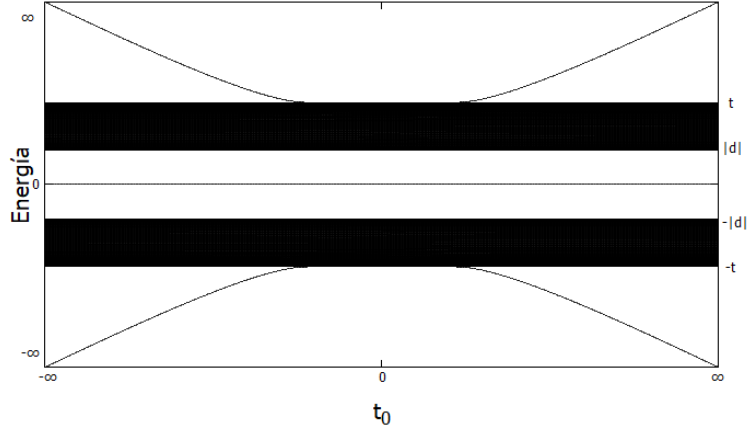
(b) $t = 1.2$, $d = 0.5$

Figura 9: Espectros de energías en la fase trivial para distinto número de partículas. La imagen (a) se ha realizado con 400 fermiones, mientras en la figura (b) se emplearon 399 fermiones.

Como vemos en la imagen superior, ambas bandas y los estados para valores $\pm\infty$ en energía y t_0 no se alteran, sin embargo entre las bandas aparece un único estado de energía nula al tener un número de fermiones impar.

En el caso $t_0 = 0$, $d = t$ el acoplo t_+ domina, de manera que podemos visualizar la cadena como un conjunto de dímeros conectados con dicho acoplo. Si definimos la celda unidad sobre estos dímeros podemos interpretar el conjunto como un fermión inicial libre y una secuencia de dímeros. Si $d < 0$ el las celdas unitarias serán las mismas que en el modelo original, pero el fermión desacoplado pasará al extremo derecho. En ambos casos dicho estado se localizará sobre la subred A. Según vamos aumentando t_0 el fermión libre se puede acoplar, y podemos definir la celda unidad a partir de los fermiones con el acoplo variable, de manera que la función de ondas solo se podrá extender en esa dirección sobre el nuevo fermión libre que se encuentra en la subcadena B.

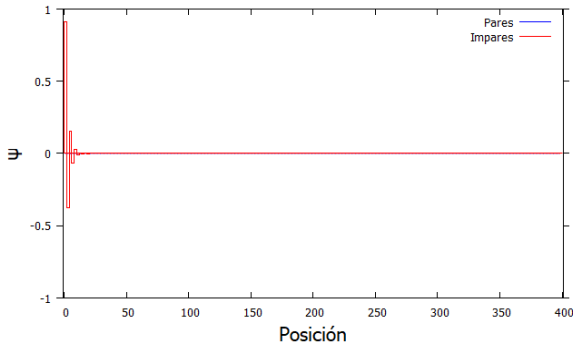
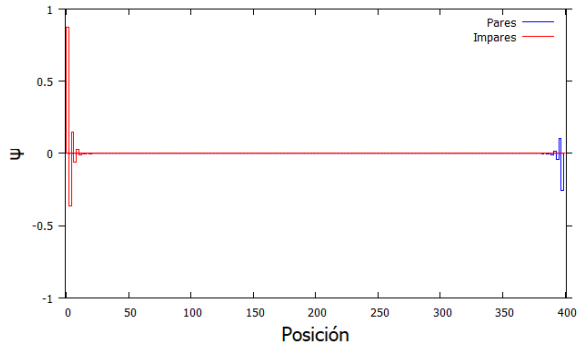
(a) $t_0 = 0$ (b) $t_0 = 0.5$

Figura 10: Estados de energía $E=0$ para valores de t_0 distintos. En la figura (a) vemos la localización en el extremo izquierdo, y como se extiende a través de t_0 en la figura (b) sobre los fermiones del extremo derecho.

5. Cadena con desorden aleatorio

En esta sección vamos a introducir el proceso de *quench* y *annealed disorder*. Hasta ahora los casos que hemos estudiado eran idealizaciones pero en la realidad cualquier cadena estaría sometida a efectos externos que podrían modificar los acoplos entre fermiones, por ejemplo, las fluctuaciones térmicas. Estos efectos externos se pueden introducir modificando aleatoriamente los acoplos t_+ y t_- o incluyendo términos de autoacoplos en los fermiones, de manera que añadimos al hamiltoniano (4.1) un término diagonal de la forma:

$$H_{rand} = H + \sum_{n=1}^N \left(h_n a_n^\dagger a_n + h'_n b_n^\dagger b_n \right) = \begin{pmatrix} h_1 & t_- & 0 & 0 & \dots & t_0 \\ t_- & h'_1 & t_+ & 0 & \dots & 0 \\ 0 & t_+ & h_2 & t_- & \dots & 0 \\ 0 & 0 & t_- & h'_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & t_+ \\ t_0 & 0 & 0 & 0 & t_+ & h'_n \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Este ruido introducido a su vez puede ser invariante según evoluciona t_0 , lo que se conoce como *quench disorder*, o puede ir cambiando según lo haga t_0 , que se corresponde al *annealed disorder*.

Antes de nada vamos a introducir el papel que juegan las simetrías en nuestro sistema para estudiar sus propiedades en el caso de tener algún desorden.

5.1. Simetría quiral

Las simetrías se definen en mecánica cuántica mediante operadores unitarios \hat{U} . Diremos que un hamiltoniano \hat{H} tiene simetría quiral si cumple:

$$\hat{\Gamma} \hat{H} \hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H} \quad (5.2)$$

Por ejemplo, para $H(k)$ de (3.2) con coeficientes dados por (3.4) la matriz de Pauli σ_z proporciona esta simetría.

Además de esto, el propio operador $\hat{\Gamma}$ tiene que presentar ciertas propiedades[2]:

- 1) El operador, además de ser unitario, deberá ser hermítico por lo que:

$$\hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^\dagger = \hat{\Gamma}^2 = 1 \quad (5.3)$$

- 2) Los elementos de matriz entre diferentes posiciones de la cadena deben anularse, $\langle i, J | \hat{\Gamma} | i', J' \rangle = 0 \ \forall \ J, J' = \{A, B\}$. De forma más genérica se dice que el operador debe ser local, pudiendo escribirse como suma directa de operadores, en el que cada uno actúa solo sobre el espacio de Hilbert de una celda unidad.
- 3) El operador debe ser robusto. Actualmente nuestro hamiltoniano depende de dos parámetros, t y d , y estos pueden tomar cualquier valor. Si para cualquier conjunto de parámetros se tiene simetría quiral, y por tanto se cumple (5.2), se podrá decir que nuestro operador es robusto.

Si alguna de estas propiedades no se cumple el sistema dejará de tener simetría quirál. En particular usaremos la segunda propiedad para romper esta simetría y estudiar el comportamiento del sistema. De esta forma al perturbar la cadena sobre los acoplos t_+, t_- , preservamos la simetría quirál; pero al introducir el desorden mediante autoacoplos h'_n, h_n la perdemos, ya que estas variables aleatorias no actúan sobre la celda unidad, sino sobre las subcadenas.

Es interesante incidir en la definición de la simetría quirál ya que tiene una consecuencia directa sobre el espectro de energías. Si nuestro hamiltoniano es quirál, cada autoestado de energía E tendrá asociado otro con energía $-E$.

$$\begin{aligned} H |\psi_i\rangle &= E_i |\psi_i\rangle \\ H \hat{\Gamma} |\psi_i\rangle &= -\hat{\Gamma} H |\psi_i\rangle = -\hat{\Gamma} E_i |\psi_i\rangle = -E_i \hat{\Gamma} |\psi_i\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

Cabe destacar que la simetría quirál se puede modificar definiendo los proyectores sobre cada una de las subcadenas:

$$P_A = \frac{\mathbb{1} + \hat{\Gamma}}{2} \quad P_B = \frac{\mathbb{1} - \hat{\Gamma}}{2} \quad (5.5)$$

De donde se puede deducir:

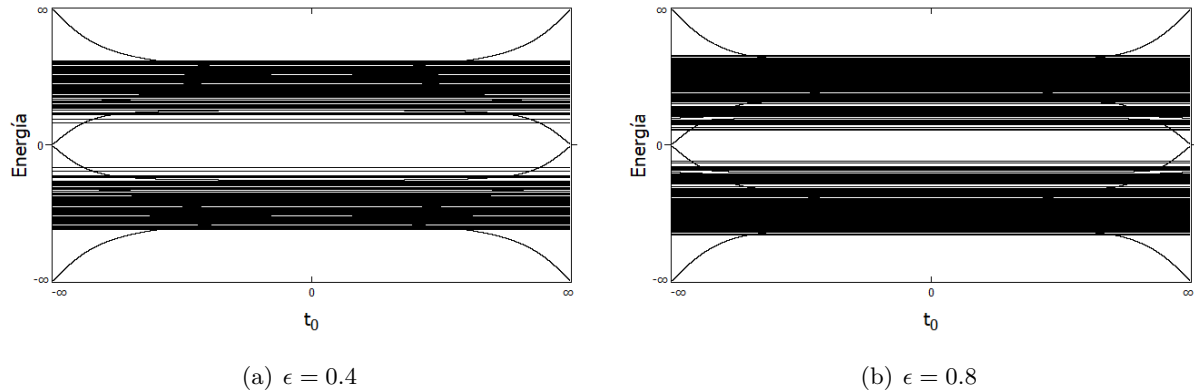
$$0 = P_B H P_B = P_A H P_A \quad (5.6)$$

Esto nos indica que el hamiltoniano no puede tener transiciones entre fermiones pertenecientes a la misma subcadena, idea que encaja con el concepto de localidad definido anteriormente.

Tras esto ya podemos estudiar qué ocurre en el sistema tras la ruptura de la simetría quirál. Para ello realizaremos las simulaciones con $N=200$, $t=1.2$, $d=\pm 0.5$. Las modificaciones directas sobre t_+, t_- , y h_n, h'_n , serán números aleatorios en el rango $(-1, 1)$.

5.2. Desorden quench

Empezaremos estudiando más en detalle los espectros obtenidos en la fase trivial (Figura 5). Para ello introducimos un quench de las dos formas posibles.



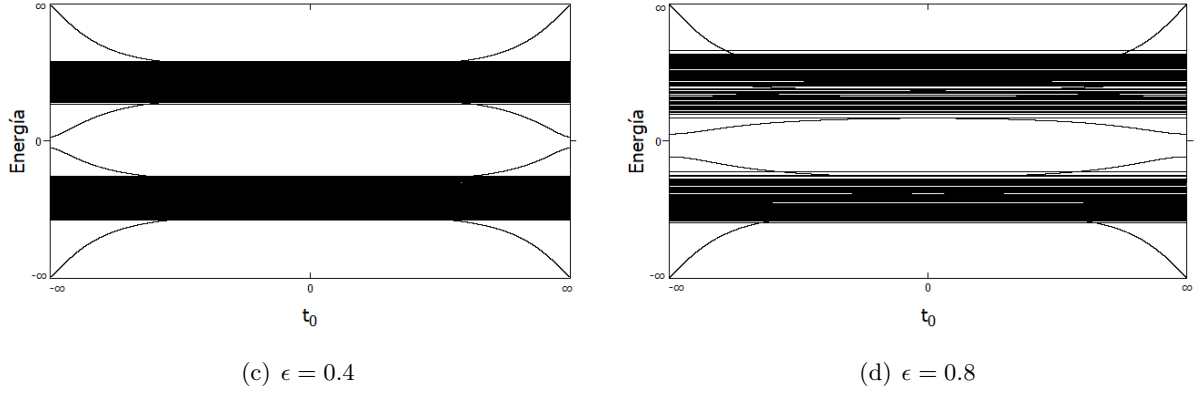


Figura 11: Espectros de energías obtenidos al aplicar quenched disorder sobre la fase trivial. En las figuras (a) y (b) el ruido introducido mantiene la simetría quiral. En los casos (c) y (d) la perturbación rompe la simetría.

Al introducir ruido quiral los estados entre las bandas se ven deformados de manera que al seguir aumentando el valor de ϵ comienzan a extenderse, al contrario que en el caso no quiral donde cualquier mínimo desorden elimina uno de los estados.

A medida que aumentamos la perturbación los dos estados aparecen en el mismo extremo de la cadena, de manera que el estado cuyas energías conectaban ambas bandas (Figuras 7c y 7d) desaparecen lo cual se refleja en la aparición de un gap de energías en t_0 , de esta forma la única manera que teníamos para promocionar entre bandas desaparece y el material pasa a ser aislante.

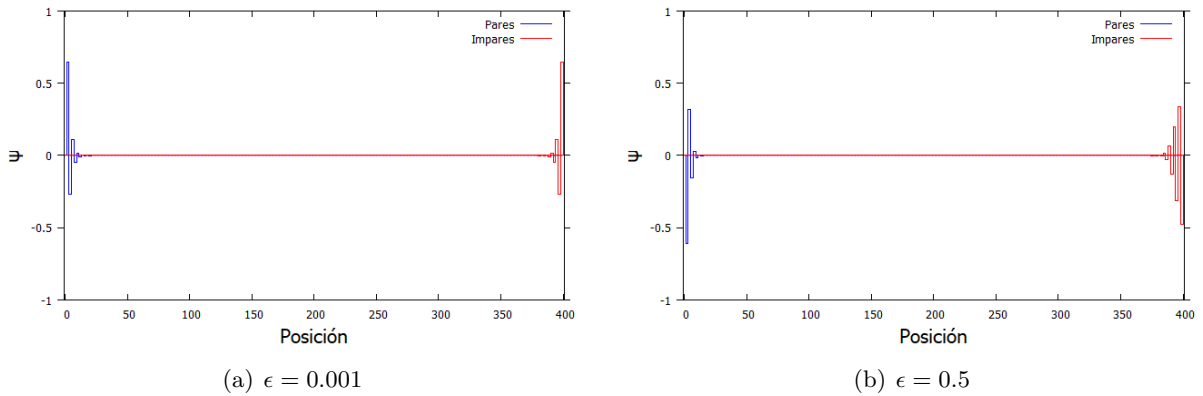


Figura 12: Estados entre bandas en la fase trivial al introducir ruido quiral. Según vamos aumentando la perturbación las funciones de onda empiezan a deformarse y extenderse, pero no desaparecen.

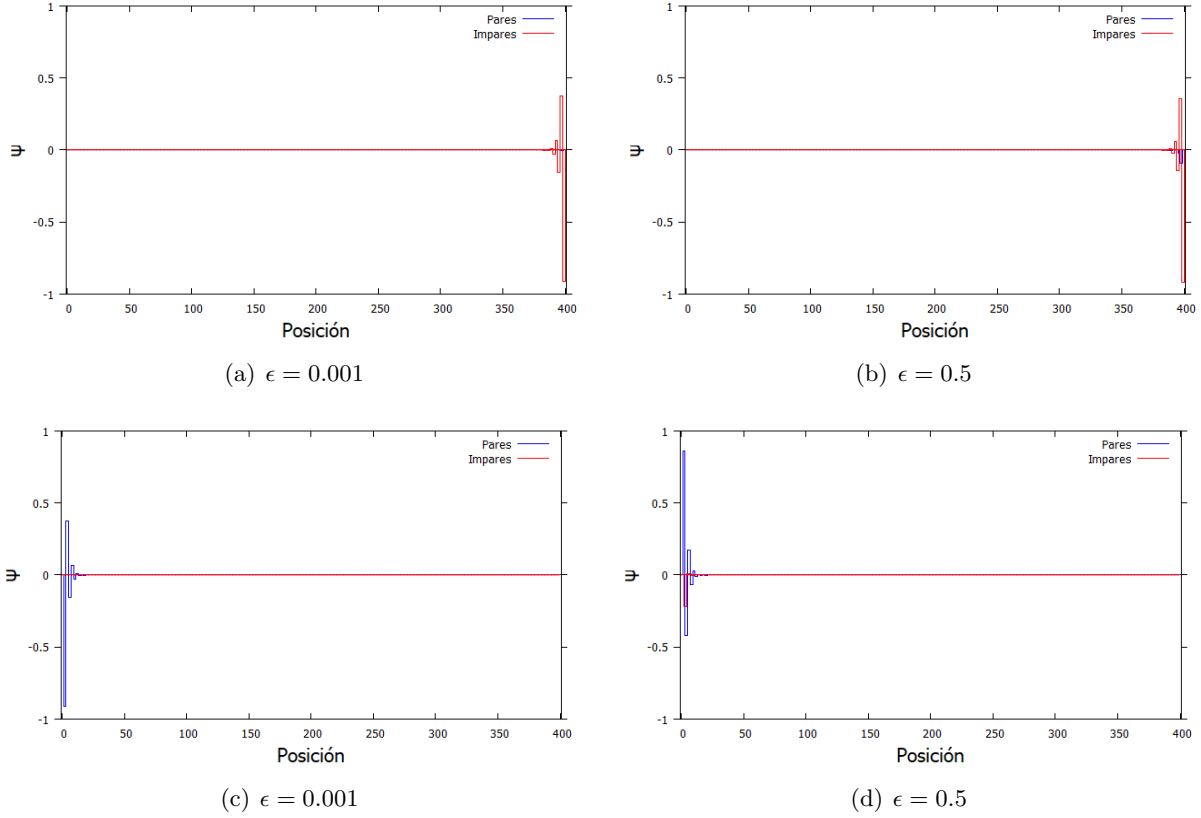


Figura 13: Estados entre bandas de energía negativa (a) y (b); y energía positiva (c) y (d) al introducir ruido no quirral. Romper la simetría quirral tiene una consecuencia directa sobre los estados de borde, eliminando uno de estos y por ello la conexión entre las bandas.

Cabe mencionar que al introducir el desorden se produce el fenómeno de localización de Anderson en el cual los estados de las bandas, en lugar de estar extendidos a toda la cadena, aparecen localizados fuera del defecto en posiciones aleatorias.

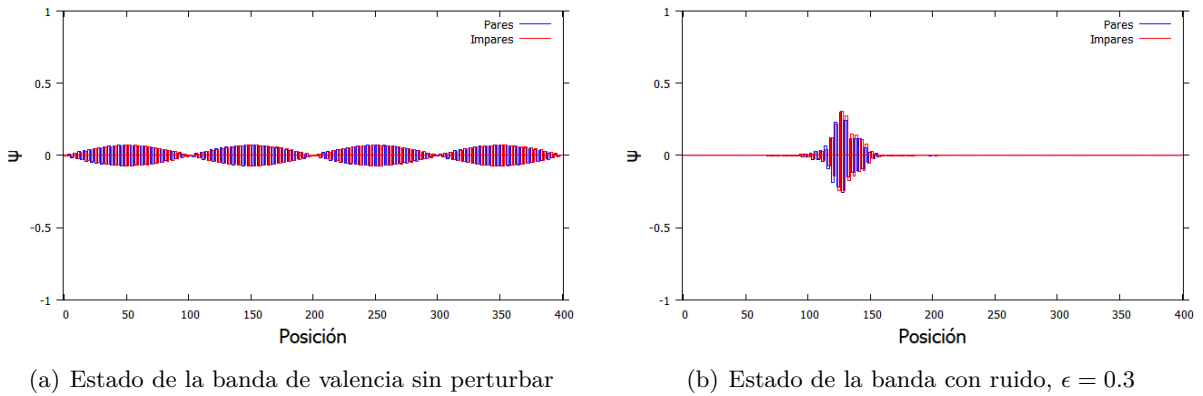


Figura 14: Cambio en el estado de un fermión perteneciente a la banda de valencia. Al introducir ruido la función de onda se localiza parcialmente a lo largo de la cadena. Este fenómeno universal se conoce como localización Anderson.

Los estados con $E = \pm\infty, t_0 = \pm\infty$ son robustos en el sentido de que solamente perturba-

ciones muy elevadas son capaces de modificar sus funciones de onda, independientemente de si la simetría quiral se mantiene o no y de la fase en la que estemos. Sin embargo, los estados entre bandas, con $|E| < t_{\pm}$, son frágiles y se destruyen si $\epsilon \gg t_{\pm}$, por ello consideraremos, en adelante, valores de $\epsilon < 1$.

Vamos a examinar que ocurre al introducir el ruido sobre la fase topológica.

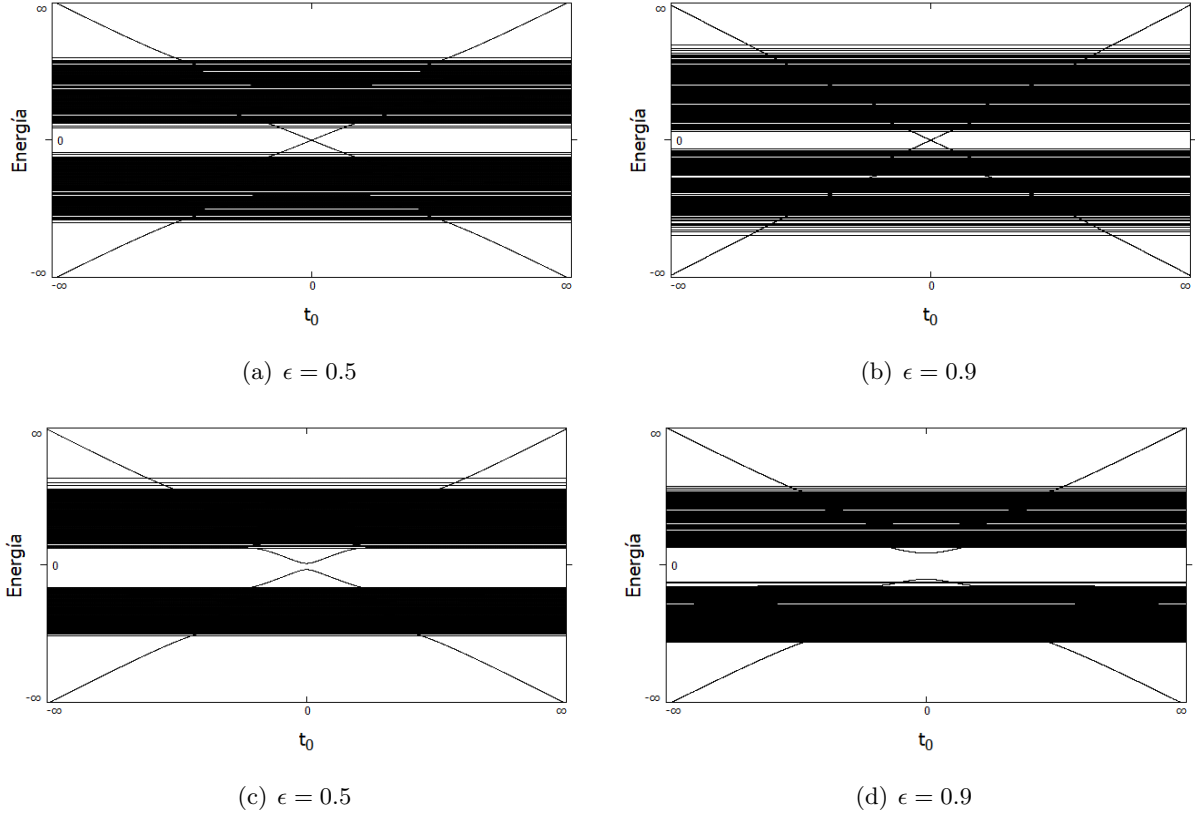


Figura 15: Espectros de energías obtenidos al aplicar quenched disorder sobre la fase topológica. En las figuras (a) y (b) se introdujo ruido quiral, mientras en las figuras (c) y (d) la simetría quiral se pierde.

Para un valor no nulo de t_0 vimos en la figura 7 que las funciones de onda pasaban de estar confinadas en un extremo a extenderse a través del defecto. La perturbación quiral vuelve a deformar y extender los estados confinados según ϵ aumenta. Cuando el ruido rompe la simetría quiral uno de los estados vuelve a desaparecer y solo se encuentra en un extremo del acoplo variable lo que impide.

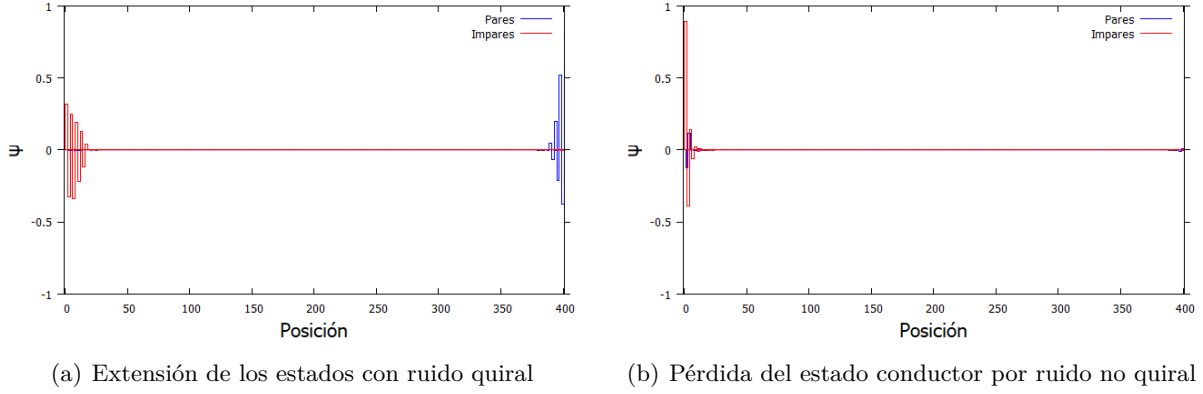


Figura 16: Funciones de onda para $t_0 = 0.01$ con ruido quirál y no quirál ($\epsilon = 1$). Mientras la perturbación mantiene la simetría quirál, el estado conductor entre bandas solamente se ve deformado. Romper la simetría destruye este estado, lo que genera un gap de energías.

5.3. Desorden annealed

Como relatamos, los números aleatorios que introducen desorden puede depender o no de t_0 . Ahora tomaremos valores diferentes para cada t_0 , además iremos aumentando estas perturbaciones, de manera que la variación de los acoplos, h_n y h'_n estarán en el rango $(-\epsilon, \epsilon)$.

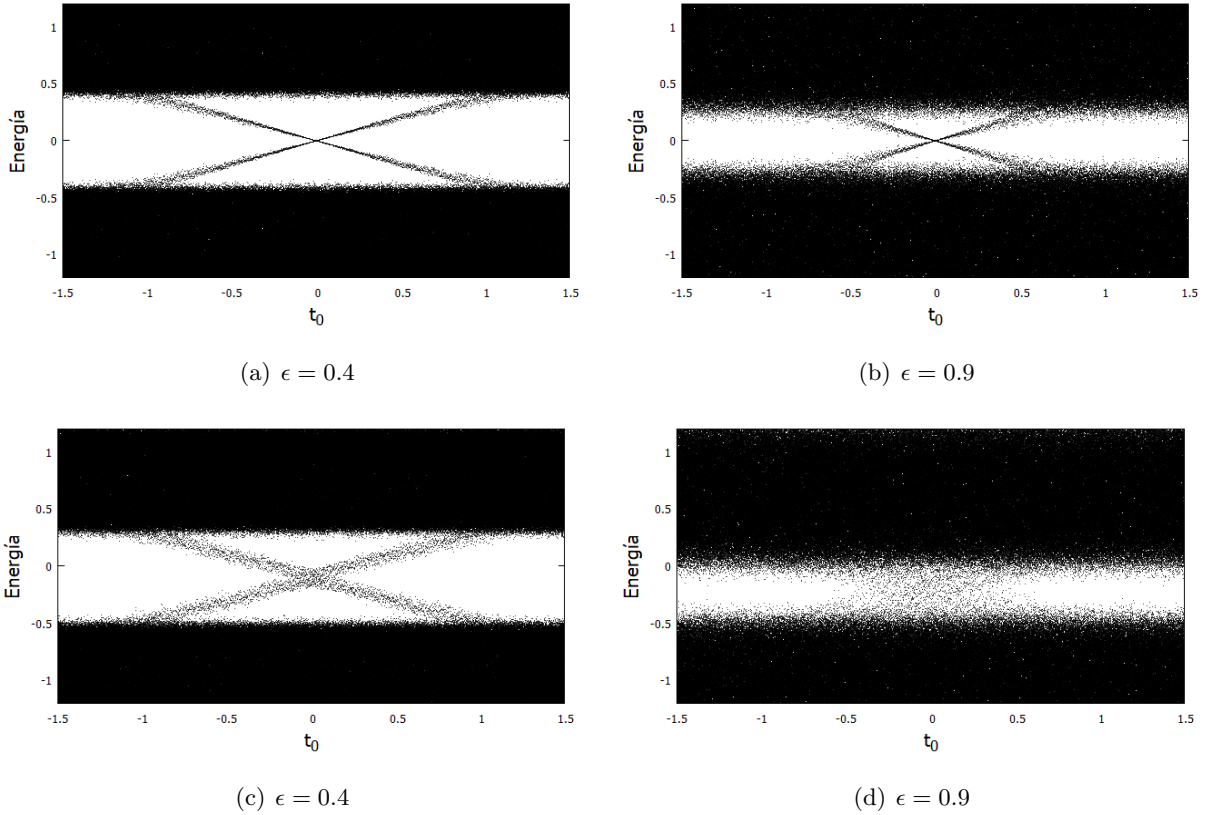


Figura 17: Espectros de energía en la fase topológica con ruido annealed. La perturbación mantiene la simetría quirál en las figuras (a) y (b), mientras en las imágenes (c) y (d) se rompe la simetría.

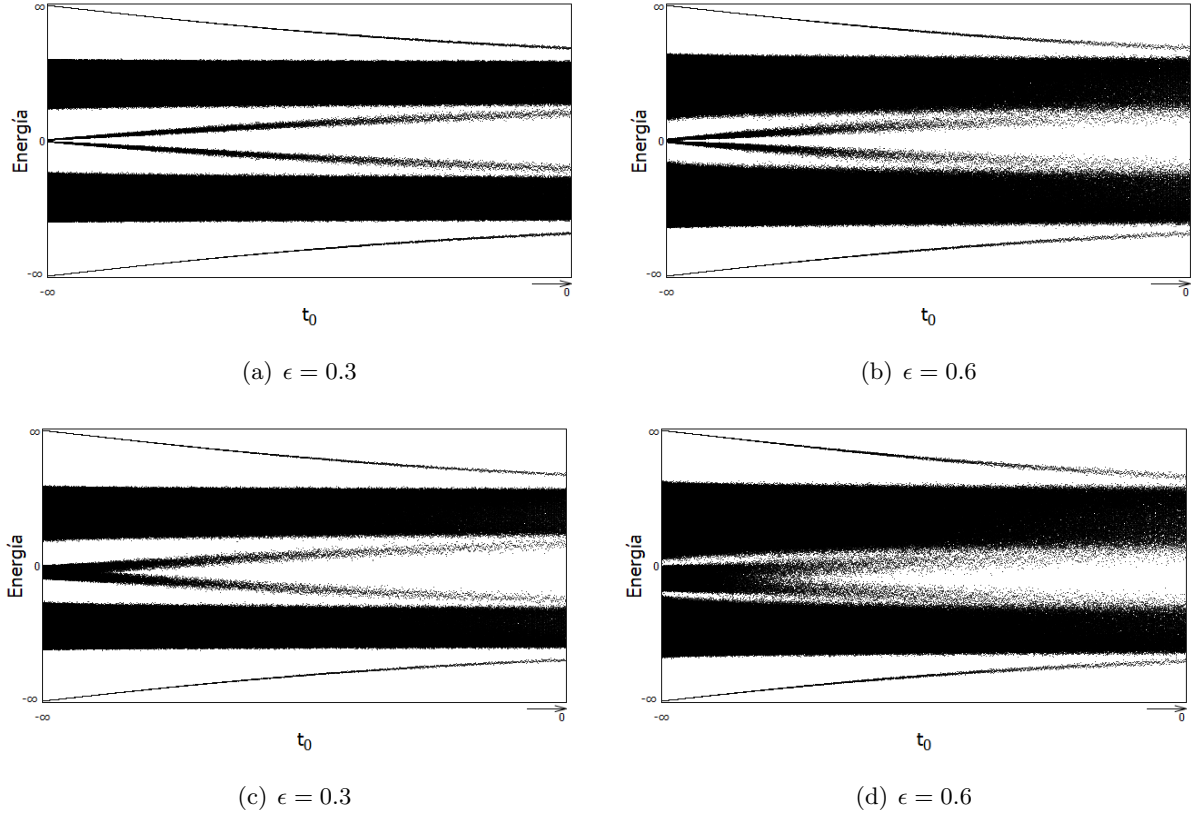


Figura 18: Introducción de ruido annealed sobre la fase trivial con valores de $t_0 = -\infty$. En las figuras (a) y (b) se mantiene la simetría quiral, mientras, en las imágenes (c) y (d) se añadieron términos no quirales.

Al contrario que el ruido quench, introducir una perturbación annealed ya no genera un gap sobre el espectro de energías. En el caso con ruido quiral, las funciones de onda en las bandas con energías cercanas al gap ($E \approx \pm |d|$) y que se encuentran extendidas a lo largo de la cadena pasan de las bandas a encontrarse con los estados que hacían de puente entre ellas, modificando ligeramente su energía según la perturbación introducida. Los estados de borde con energía nula no se ven alterados en este caso gracias a que la simetría quiral se mantiene.

Sin embargo, cuando la simetría quiral se rompe, los estados de energía nula ya no están protegidos por lo que sus energías también se ven modificadas. Además, las funciones de onda que existían en las bandas para el valor de $t_0 = 0, \pm\infty$ en las fases topológica y trivial, respectivamente, también se ven alteradas y pueden realizar un cambio brusco en su energía y función de ondas, encontrándose con los estados entre bandas. Estos cambios en las energías de los estados son los que se visualizan como un efecto de difuminado.

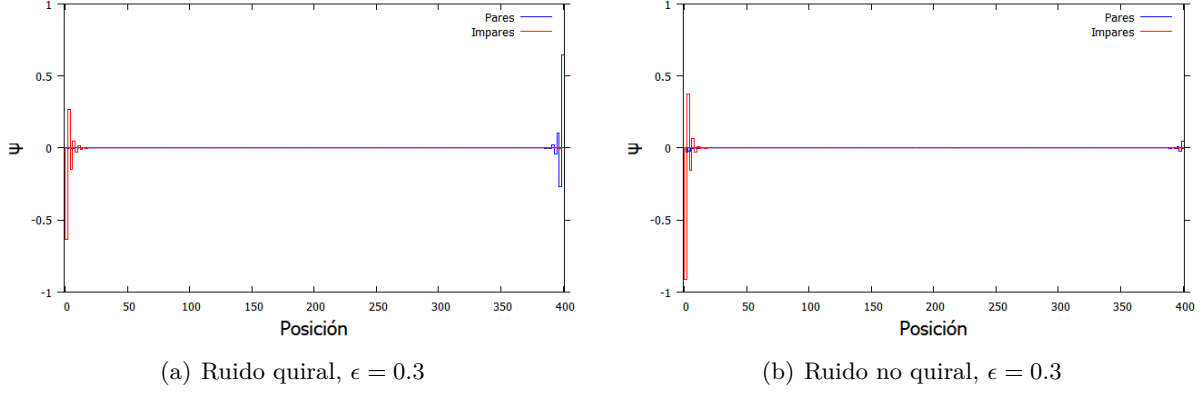


Figura 19: Funciones de onda en la fase topológica de energía cero. Al introducir ruido quiral la función de onda no se ve perturbada respecto a la original (Figura 7), pero el ruido no quiral si modifica el estado y su energía.

6. Aislantes topológicos

Hemos visto como el modelo de Su-Schrieffer-Heeger para una cadena unidimensional nos introduce a la aparición de estados de borde protegidos por la simetría quiral.

Ciertos materiales, como el polímero *trans*-poliacetileno han permitido medir experimentalmente estos estados de borde así como sus invariantes topológicos. Uno de los métodos utilizados es inyectar un conjunto de átomos en diferentes lugares del espacio de momentos y estudiar su evolución, de esta manera podemos observar que solo cuando la población se inyecta sobre el defecto los átomos se mantienen en la misma posición según avanza el tiempo.

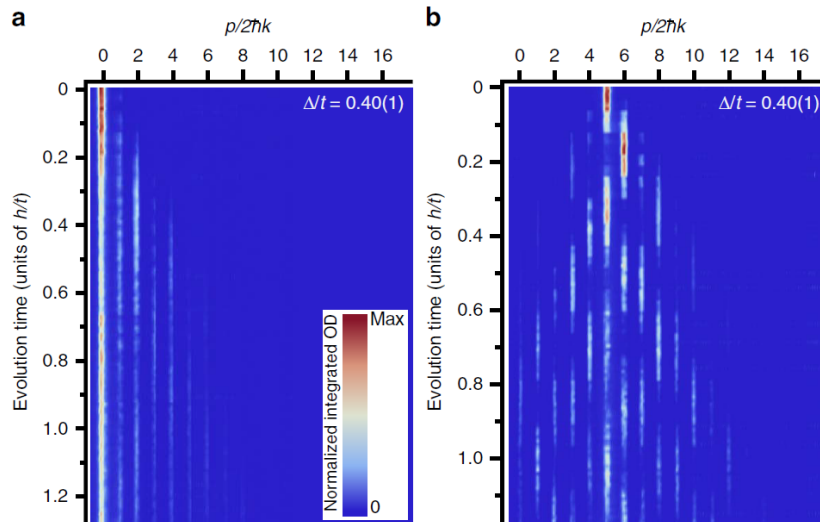


Figura 20: [3](a) Al inyectar átomos sobre el defecto (posición 0 en el eje de abscisas) estos no se dispersan sobre la red, lo que si ocurre cuando la inyección es en cualquier otro sitio del bulk (b).

Aun así, la mayoría de aislantes topológicos que conocemos actualmente que presentan el

mismo comportamiento no son unidimensionales. Estos materiales se han convertido recientemente en un tema puntero de investigación por sus propiedades únicas y los recientes estudios teóricos que han permitido entender en gran medida su comportamiento. A diferencia del modelo SSH y su variable t_0 , en los aislantes topológicos de mas dimensiones tenemos dos momentos k_x y k_y en cada una de las direcciones posibles, lo cual expande el conjunto de parámetros y las relaciones de dispersión pasan a ser estructuras en tres dimensiones.

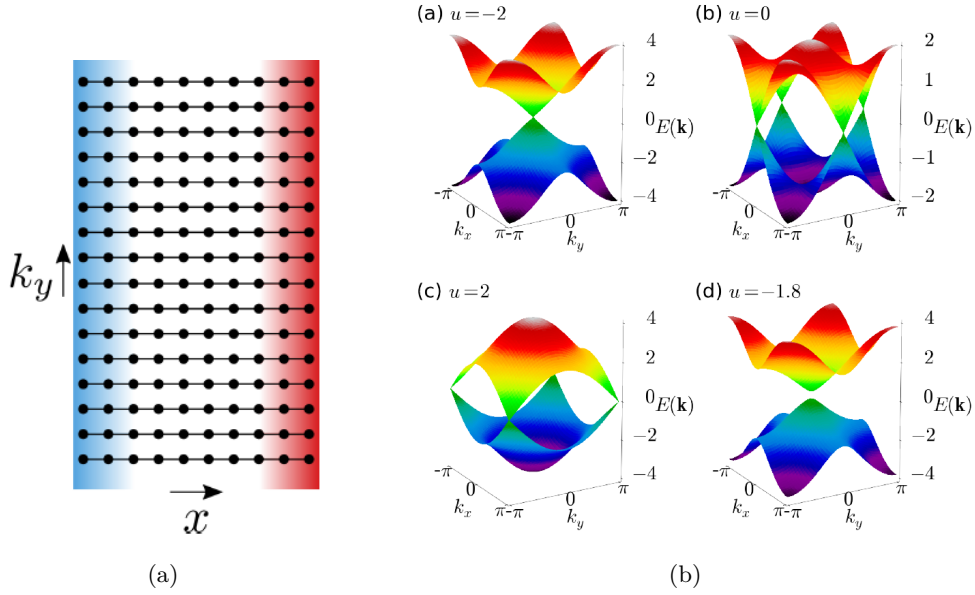


Figura 21: [1]Estructura de un posible aislante topológico 2D, correspondiente al modelo de Qi-Wu-Zhang (a) y posibles relaciones de dispersión en función de su acoplo u sobre cada fermión (b).

Es evidente que las relaciones de dispersión que vimos en la figura 5 son equivalentes a la proyección sobre el plano (k_y, E) ; y las secciones transversales con k_y fijo se corresponden a la figura 2 donde el momento k_x para a ser nuestro momento k .

Gracias a esto podemos inferir muchas propiedades de los aislantes 2D reduciéndolos al modelo SSH y realizando diferentes modificaciones sobre esta, por ejemplo introduciendo acoplos dependientes del tiempo (modelo Rice-Mele) o rompiendo nuevas simetrías. De esta manera podemos realizar una extensión dimensional para introducir el momento k_y y deducir el comportamiento del material con mayor dimensionalidad a partir de su variante unidimensional.

7. Conclusiones

Recapitulando, tras el estudio analítico del modelo de Su-Schrieffer-Heeger pudimos ver las diferentes relaciones de dispersión en función de los acoplos elegidos. Aquí ya pudimos empezar a observar que ciertos casos estaban relacionados con los invariantes que aparecen en los aislantes topológicos y la aparición de estados de borde.

Para estudiar en más detalle los estados de borde modificamos uno de los acoplos de la cadena, por lo cual vimos la necesidad de realizar simulaciones numéricas para obtener las energías y autoestados de los posibles sistemas. Así, probando diferentes modificaciones sobre los acoplos de la cadena y el número de fermiones de la misma obtuvimos que la aparición de estados de borde de energía nula nos permitía pasar de un material aislante a uno conductor.

La raíz de este comportamiento es debida a la simetría quirál que posee el modelo. Para entender desde otro punto de vista los estados de borde y tener un modelo más realista introducimos ruido de dos maneras posibles: quench y annealed. Además, en cada uno de ellos podíamos elegir si la simetría quirál estaba presente o se rompía.

Así concluimos que los estados conductores que conectan las bandas surgen por la simetría quirál del sistema, la cual actúa como protección ante perturbaciones. En el caso de perder la simetría aparecerán gaps o las funciones de onda entre bandas se verán modificadas de manera que el material ya no será conductor.

Para finalizar el trabajo, podemos dar una idea de posibles continuaciones del mismo para entender con mayor profundidad los nuevos sistemas que surjan en el futuro. Una elección sería realizar la extensión dimensional del modelo ya estudiado para ver como los aislantes topológicos bidimensionales se ven afectados al perder la simetría, lo que tal vez también permitiese explicar el origen de las funciones de onda robustas de energía $E \rightarrow \pm\infty$ a $t_0 = \pm\infty$; o estudiar los estados de borde en sistemas unidimensionales que evolucionan temporalmente, ya sea modificando los acoplos o el ruido introducido. Esto daría lugar a la aparición de nuevas simetrías con sus correspondientes consecuencias sobre los estados de borde y la conductividad del sistema.

Bibliografía

- [1] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, A. Pályi. *A short course on topological insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions*. Septiembre 2015. DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8.
- [2] Shun-Qing Shen. *Topological insulators: Dirac equation in condensed matter*. 2012 DOI: 10.1007/978-3-642-32858-9.
- [3] Meier, E., An, F. & Gadway, B. *Observation of the topological soliton state in the Su–Schrieffer–Heeger model*. Nature Communications, volumen 7, número 1, Diciembre 2016. DOI: 10.1038/ncomms13986.
- [4] Alcácer, L., Henriques, R. T., & Almeida, M. (2016). *Interacting Electrons in One Dimension: The Two Chain Perylene-Metal Dithiolate Series*. Diciembre 2016. DOI: 1612.08413